

Nelson 流量子力学の散逸系への拡張と トンネル時間への影響

早大理工 今福健太郎、大場一郎

1 はじめに

近年、トンネル現象の物理、とくに多くの自由度が関係する現象について高い関心が寄せられている。注目する自由度とそれ以外の環境系との相互作用によるエネルギーの授受、いわゆる“散逸”はこれまでの量子論的枠組では、扱いづらいものであるが、この現象を、純粋に量子論的效果であるトンネル現象にどのように取り入れればよいか、あるいは、それがどのような効果があるのかという問題は、理論、応用の両面から大変興味深い。

一方、超微細加工技術の発展は、これまでアカデミックな興味でしかなかった問題を直接実験し、検証することを可能にしたとともに、これまでとは逆に、理論側に新しい枠組を要求している。例えば「トンネル粒子がどれだけ時間をかけて、障壁を通過するか?」といういわゆる“トンネル時間”の問題は、これまでの透過確率などを計算する定常的な枠組を越えて、ダイナミカルな扱いを必要とただけでなく、観測量ではあるが力学量ではない“時間”についても量子力学な扱いを要請した。これは、力学量の期待値を予言するという従来のコペンハーゲンの枠組を越えた要請であり、そのため従来の量子力学に従い“トンネル時間”を明確に定義することは、非常に困難であると考えられてる [1~21]。しかしながら我々は、実時間の確率過程によって量子系を記述する Nelson 流の量子力学に基づきトンネル現象を解析することにより障壁通過時間をはじめ、この現象に特徴的なその他の時間について研究を行ってきた [23~25]。

そこで今回は、散逸の効果を現象論的に取り入れた effective な Schrödinger 方程式に対して Nelson 流の量子力学の拡張を行い、散逸のある場合のトンネル時間について考察を行う。

2 Nelson 流量子力学

Nelson の量子力学 [22] は、量子力学的な粒子の運動を真空から与えられる量子揺らぎによるブラウン運動（実時間確率過程）として記述する手法である。コペンハーゲン解釈で確率存在密度として理解される波動関数の絶対値二乗 $|\psi(x, t)|^2$ を確率変数 $x(t)$ の分布として再現する具体的な手段であり、各試行ごとの記述の考察など、新しい立場からの量子論を構築する上でも興味深い理論である。非相対論的 1 粒子、単一チャンネル系の場合には正準量子化とは独立に閉じた理論体系を作ることができる、いわゆる「量子化法」の一つである。この量子化法には大きく二つの

柱があり、一つは Fokker-Planck 方程式で与えられる運動学的な条件式と、もう一つは Nelson によって提唱された Nelson-Newton 方程式と呼ばれる力学を与える基礎方程式である。これらの式と Schödinger 方程式が等価であることが E. Nelson によって [22] で示された。

2.1 運動学的条件

量子力学的な粒子の位置を表す変数 $x(t)$ の時間発展は次の Ito 型確率微分方程式によって時間発展するものとする。順方向の時間前進発展 (forward) に対して、

$$dx(t) = b(x(t), t)dt + dw(t), \quad (2.1)$$

$$\langle dw(t) \rangle = 0 \quad \langle dw(t)dw(t) \rangle = \frac{\hbar}{m}dt, \quad (2.2)$$

逆方向の時間後退発展 (backward) に対して

$$dx(t) = b_*(x(t), t)dt + dw_*(t) \quad (2.3)$$

$$\langle dw_*(t) \rangle = 0 \quad \langle dw_*(t)dw_*(t) \rangle = \frac{\hbar}{m}dt. \quad (2.4)$$

(2.2)、(2.4) は、量子揺らぎを表す雑音項の統計的性質を与える。これらの式は、確率変数 $x(t)$ の分布関数 $P(x, t)$ の前向き時間発展

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial}{\partial x}b(x, t) + \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x, t), \quad (2.5)$$

および、時間後退発展

$$-\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}b_*(x, t) + \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x, t) \quad (2.6)$$

の二式で、書き直すことができる。これらの方程式はあとで述べる Nelson-Newton 方程式とともに、この量子化の基礎方程式である。

ここで、 u と v を

$$u = \frac{b - b_*}{2} \quad v = \frac{b + b_*}{2} \quad (2.7)$$

として、(2.5) と (2.6) の和を考えると

$$\frac{\partial}{\partial x}((b - b_*)P + \frac{\hbar}{m}\frac{\partial P}{\partial x}) = 0 \quad (2.8)$$

となり、物理的な境界条件を考えると無限遠方で被微分項が 0 になることから

$$u = \frac{b - b_*}{2} = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (2.9)$$

である。また (2.5) と (2.6) の差は

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vP) \quad (\text{連続の式}) \quad (2.10)$$

となる。この (2.9) と (2.10) から P を消去すれば

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}(uv) \quad (2.11)$$

が得られる。この式は (2.5) や (2.6) と等価の式で運動学的な条件を与えている。

2.2 力学的条件

次に確率変数の力学を決定する。そのため「平均微係数」を次のように定義する。
「前向き平均微係数 $Df(t)$ 」

$$\lim_{\Delta t \rightarrow +0} < \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} | f(s \leq t) \text{ fixed} >, \quad (2.12)$$

「後ろ向き平均微係数 $D_*f(t)$ 」

$$\lim_{\Delta t \rightarrow +0} < \frac{f(t) - f(t-\Delta t)}{\Delta t} | f(s \geq t) \text{ fixed} >. \quad (2.13)$$

「後ろ向き平均微係数 $D_*f(t)$ 」

$$\lim_{\Delta t \rightarrow +0} < \frac{f(t) - f(t-\Delta t)}{\Delta t} | f(s \geq t) \text{ fixed} >. \quad (2.14)$$

(2.1) から (2.4) を考えると、

$$a(x(t), t) = \frac{DD_* + D_*D}{2} x(t) \quad (2.15)$$

で定義される時間について対称な扱いをされた「平均加速度」は

$$a(x, t) = -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x}(v^2 - u^2) + \frac{\partial v}{\partial t} \quad (2.16)$$

となる。この「平均加速度」がポテンシャルの勾配に比例するとして Newton の運動方程式

$$a = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} V \quad (2.17)$$

を適用すれば、

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial v}{\partial x} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x} \quad (2.18)$$

が得られ、この式はこの量子化に力学を与える基礎方程式で Nelson-Newton 方程式と呼ばれている。

2.3 Schrödinger 方程式の導出

ここで、(2.11) と (2.18) から Schrödinger 方程式を導出しその同値性を示す。Nelson 流量子力学の基礎方程式である (2.11) と (2.18) は、非線形の連立方程式でこれを直接解くことは極めて難しい。しかし

$$(2.11) + i(2.18) \quad (2.19)$$

を計算し

$$u + iv = \frac{1}{\psi'} \frac{\partial \psi'}{\partial x} \quad (2.20)$$

とおくと、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[i \frac{\hbar}{m} \frac{1}{\psi'} \frac{\partial \psi'}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \frac{1}{\psi'} \frac{\partial^2 \psi'}{\partial x^2} - \frac{1}{m} V \right] = 0 \quad (2.21)$$

が得られる。さらに

$$\psi = \psi' \exp \left(-\frac{im}{\hbar} \int^t \eta(s) ds \right) \quad (2.22)$$

とすれば、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi \quad (2.23)$$

が導出される。この (2.23) を解けば Nelson の量子力学を行うにあたり求めるべき諸量、即ち $b(x, t)$ 、 $b_*(x, t)$ 、 $P(x, t)$ は関係式 (2.19) から直ちに計算できて

$$b(x, t) = \frac{\hbar}{m} (Im + Re) \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi(x, t) \quad (2.24)$$

$$b_*(x, t) = \frac{\hbar}{m} (Im - Re) \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi(x, t) \quad (2.25)$$

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (2.26)$$

であることがわかる。ここで前出の v 、 u の意味に触れておくことにする。関係式 (2.24) と (2.25) から

$$v = \frac{b + b_*}{2} = \frac{\hbar}{m} \frac{j}{P} \quad (2.27)$$

(j は確率密度流) であり、 v は確率流密度に起因する速度なので確率流速と呼ばれる。平面波の波動関数 $\exp[ikx]$ について計算すると $v = \hbar k/m$ となり、古典的な速度と一致していることがわかる。一方 u については

$$u = \frac{b - b_*}{2} = \frac{\hbar}{m} Re \frac{\partial}{\partial x} \ln \psi(x, t) \quad (2.28)$$

であるので、ポテンシャルに浸透する波動関数 $\exp[-\kappa x]$ について計算すると $u = -\hbar \kappa/m$ となり浸透速度と呼ばれる。

以下、本論文ではこの量子力学を基本的な枠ぐみとして議論を進める。なお、細かい議論については、原論文 [22] を参照されたい

3 散逸系の現象論的“ハミルトニアン”

通常散逸系の量子力学の枠組は、無限の自由度をもつ系のある部分系に着目することにより定式化される。しかしながらその枠組は一般に複雑であり、Nelson 流量量子力学の拡張は容易ではないと考えられる。そこで今回は簡単のため、現象論的なモデルとして、古典的によく現象を記述する運動方程式

$$m\ddot{x} + 2m\gamma\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}V = 0 \quad (3.1)$$

を Heisenberg 方程式として導出する時間発展演算子の一つ

$$H_{\text{eff}} = \frac{(\hat{p} + m\gamma\hat{x})^2}{2m} + V - \frac{m\gamma^2\hat{x}^2}{2} - i\frac{\hbar\gamma}{2} \quad (3.2)$$

を採用する。詳しくは

1977 H. Dekker, Phys. Rev. A16, 2126

複素数に拡張した正準変数による量子化

1994 V. E. Tarasov, Mod. Phys. Lett. A9, 2411

最小作用の原理を非ホロノーム系に拡張

1997 I. Ohba, to be appeared

スケール変換した正準変数での量子化

を参照のこと。 H_{eff} は non-Hermit であるから、(i) 確率を保存しない、(ii) 不確定性関係を保証しないなど物理的な意味の不明な点もあるが、実際に Heisenberg 方程式を書き下してみると

$$\frac{d}{dt}\hat{p} = \frac{i}{\hbar}[V, \hat{p}] - 2\gamma\hat{p}, \quad \frac{d}{dt}\hat{x} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (3.3)$$

となり、実際 (3.1) と対応していることがわかる。また、(3.2) を

$$\vec{A} = -m\gamma\vec{x}, \quad \phi = -\frac{m\gamma^2}{2}\vec{x} \cdot \vec{x} \quad (3.4)$$

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \vec{A}\right)^2 + \phi + V - i\frac{\gamma}{2} \quad (3.5)$$

と書くと、電磁ポテンシャル中での荷電粒子に対するハミルトニアンとして見ることができ、一次元問題の場合には“ゲージ場”の空間成分を0にする“ゲージ変換”を行い ψ から $\tilde{\psi}$ へ、 H_{eff} から $\tilde{H}_{\text{eff}}$ へ移れば

$$\tilde{\psi} = \exp\left(-i\frac{m\gamma\hat{x}^2}{2\hbar}\right)\psi, \quad \tilde{H}_{\text{eff}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V - \frac{m\gamma^2\hat{x}^2}{2} - i\frac{\hbar\gamma}{2} \quad (3.6)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H_{\text{eff}}\psi \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi} = \tilde{H}_{\text{eff}}\tilde{\psi} \quad (3.7)$$

となることから、 $\tilde{H}_{\text{eff}}$ は、frequency shift をポテンシャルの実部に、damping factor をポテンシャルの虚部に繰り込んだ意味での有効ポテンシャルであることが理解できる。

4 Nelson 流量子力学の拡張

ここでは、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_{\text{eff}} \psi \quad (4.1)$$

に対応する Nelson 流量子化の拡張を行う。 H_{eff} が non-Hermit であって確率は保存しないが、この点についての拡張は、文献 [25] を参照のこと。

先で指摘したように、 H_{eff} は電磁ポテンシャル中での荷電粒子に対するハミルトニアンとして見るができる。そこで通常の Nelson 流量子化の基本方程式である Nelson-Newton 方程式

$$m\vec{\alpha} = -\vec{\nabla}V \quad (4.2)$$

の代わりに

$$m\vec{\alpha} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \vec{\nabla}(\phi + V) \quad (4.3)$$

から出発する。ただし $\vec{\alpha}$ と $\vec{v}$ は Ito 型の確率微分方程式

$$d\vec{x} = \vec{b}dt + d\vec{w} \quad (\text{forward}), \quad d\vec{x} = \vec{b}_*dt + d\vec{w}_* \quad (\text{backward}) \quad (4.4)$$

$$\langle dw_i \rangle = \langle dw_{*i} \rangle = 0, \quad \langle dw_i dw_j \rangle = \delta_{ij} \frac{\hbar}{m} dt, \quad \langle dw_{*i} dw_{*j} \rangle = -\delta_{ij} \frac{\hbar}{m} dt \quad (4.5)$$

で時間発展する確率変数 $x(t)$ から定義される “平均加速度 $\vec{\alpha} (= \frac{D \cdot D - D D \cdot}{2} x)$ ” および “平均速度 $\vec{v} (= \frac{D + D \cdot}{2} x)$ ” である。式 (4.3) と光学ポテンシャル $-i\gamma(\vec{x}, t)/2$ が存在する時の運動学的条件式 ([25] を参照)

$$\frac{\partial P(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} b_i(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma(\vec{x}, t) \right) P(\vec{x}, t) \quad \text{前進}, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial P(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} b_{*i}(\vec{x}, t) - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma(\vec{x}, t) \right) P(\vec{x}, t) \quad \text{後退} \quad (4.7)$$

を連立すると、第2節と同様の手続きを行うことによりドリフト項 $\vec{b}$ 及び $\vec{b}_*$ と (4.1) の解 ψ の関係、

$$\vec{b} = \frac{1}{m} \{ \hbar(\text{Im} + \text{Re}) \vec{\nabla}(\ln \psi) - \vec{A} \}, \quad \vec{b}_* = \frac{1}{m} \{ \hbar(\text{Im} - \text{Re}) \vec{\nabla}(\ln \psi) - \vec{A} \}, \quad |\psi|^2 = P(x, t), \quad (4.8)$$

が導かれる。((4.4) により時間発展する確率変数 $x(t)$ から、(4.6)、(4.7) に従う分布関数 $P(x, t)$ を導出する方法、及びこのとき、 $P(x, t) = |\psi|^2$ となることの証明については [25] を参照のこと。) 以上により (4.1) に対して Nelson 流量子力学を拡張することができた。

5 トンネル時間と散逸

上で拡張された Nelson 流量子力学を用い、トンネル現象の解析を行い、トンネル時間に対する散逸の効果を調べる。Nelson 流量子力学とトンネル時間については [23~25] を参照のこと。ここでは簡単のため、一次元の箱型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{in I} \quad (x < 0), \\ V_0 > 0 & \text{in II} \quad (0 < x < d), \\ 0 & \text{in III} \quad (d < x) \end{cases} \quad (5.1)$$

のトンネルポテンシャル中で大きさ一定の γ による摩擦を受けるものとする。

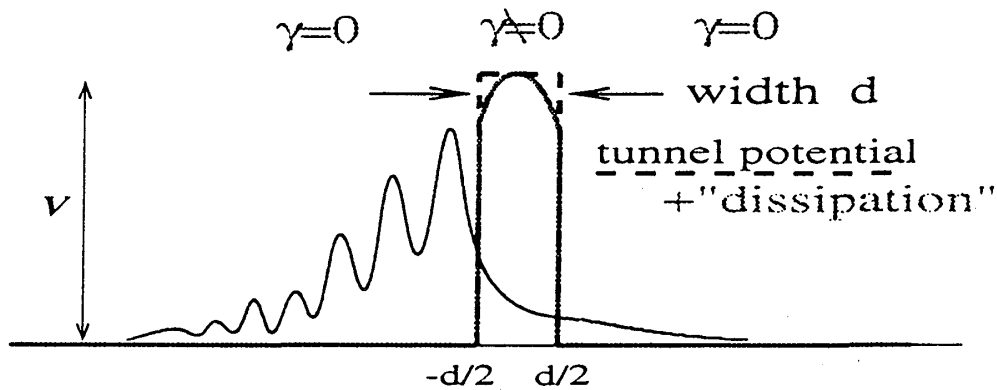


Fig. 1. 一次元ポテンシャル+散逸の効果

基本的な計算方法は

- (i) $i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \tilde{H}_{\text{eff}}\psi$ を数值的に解いて、これより b を求める。
- (ii) 確率微分方程式 $dx = bdt + dw$ ($t > 0$) に従い確率変数 $x(t)$ の時間発展を計算する。
- (iii) 最終的にポテンシャルを透過したサンプルについて、ポテンシャル領域 $-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}$ で過ごした時間 “passing time” を平均する。

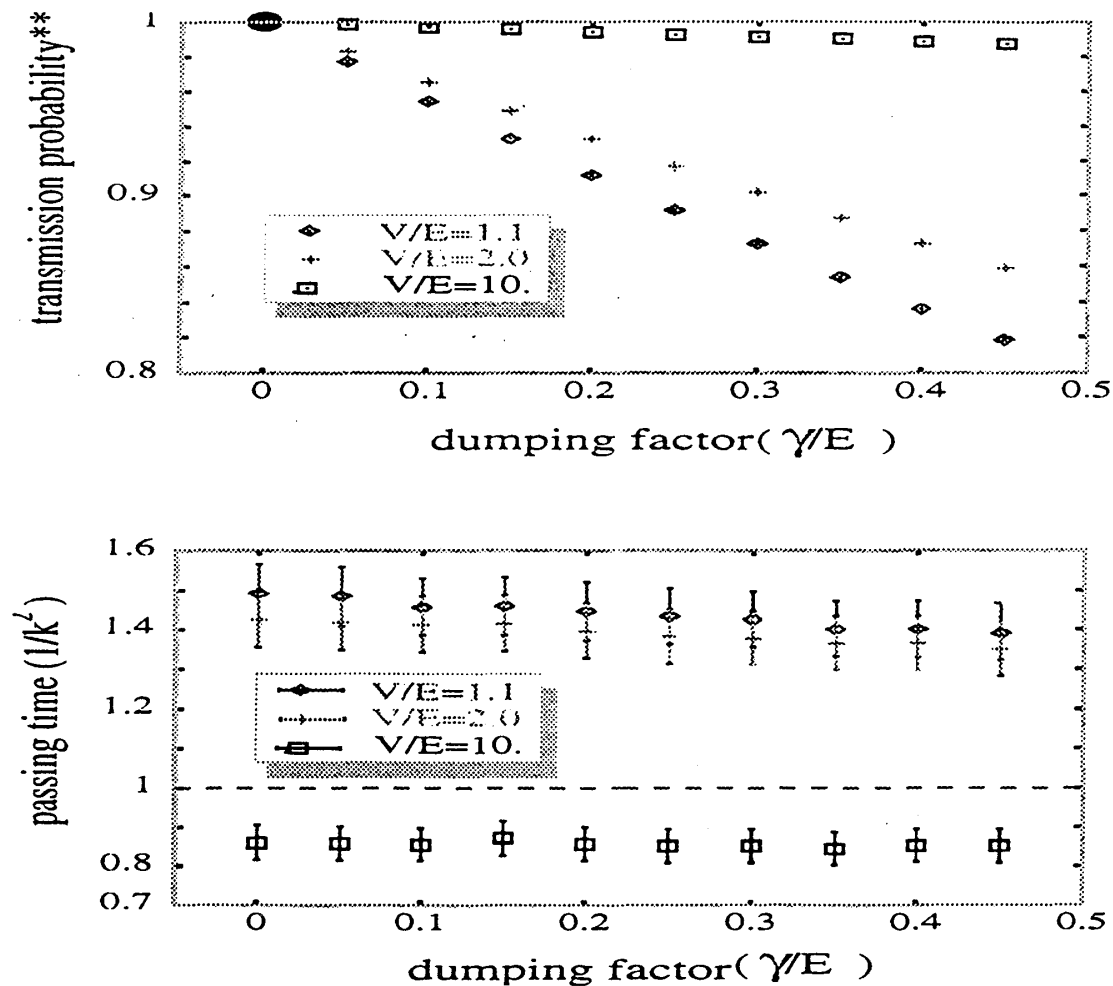
であるがこの場合、透過確率の低いパラメータでのシミュレーションでは透過サンプルが効率よく集められない(透過サンプル数は、透過確率に比例する)。そこで、一度 $i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \tilde{H}_{\text{eff}}\psi$ を最後まで解いてしまって、透過波束の分布から時間を逆行して $dx = b_*dt + dw_*$ ($t < t_f$) を計算すれば、理論的には時間順方向と同じようにして、効率よく “passing time” を得ることができるので、数値計算はすべてこの backward 形式を使って計算した (backward 形式については [23] を参照のこと)。

$\tilde{H}_{\text{eff}}$ を考えると frequency shift $-\frac{m\gamma^2 x^2}{2}$ と damping factor $\frac{-i\hbar\gamma}{2}$ はそれぞれ透過確率を上げる働きと下げる働きをする。しかし実際に、散逸の過程をこのような有効ハミルトニアンで表せるのは少なくとも、 γ による効果があまり大きくないところであると考えられるので γ とトンネル領域の大きさで決まる典型的な作用の大きさが $\frac{m\gamma d^2}{\hbar} \ll 1$ であるところに注目しシミュレーションを行った。このとき $-\frac{m\gamma^2 x^2}{2}$ に比べて $\frac{-i\hbar\gamma}{2}$ の方が大きな効果を持ち透過確率は下がる (Fig. 2.)。また、

Passing time に対するシミュレーションの結果をみるとトンネル時間については、透過確率が下がるほど短くなるのがわかるが、解析のため極端な場合を考えてみると、 $\kappa d \gg 1$ ($\kappa = \sqrt{2m(V-E)}$) で、かつ波束の大きさがポテンシャル領域に比べ十分大きく、散乱のほとんどの時間で平面波的扱いがよい近似となっている場合は、トンネル中での波動関数は $\varphi \sim \exp((- \kappa(1 - i\frac{m\gamma}{2\hbar\kappa^2})x - \frac{\gamma}{2}t)$ と近似できる。このとき backward の drift b_* は

$$b_* = \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} (\text{Im} - \text{Re}) \ln \varphi = \frac{\hbar}{m} \kappa (1 + \frac{m\gamma}{2\hbar\kappa^2}) \quad (5.2)$$

すなわち、障壁通過時間 τ_p を大まかに見積もると $\tau_p \sim \frac{md}{\kappa} (1 - \frac{m\gamma}{2\hbar\kappa^2})$ となり、 γ が大きいほどまた κ^2 が小さいほど Passing time は γ の影響を受けやすくなりシミュレーションの結果を定性的に説明することができる。



tunnel width

$$d = 1/k$$

入射波束 (ガウス型) の大きさ

$$\sigma = 10d$$

transmission probability は $\gamma = 0$ で規格化

パラメータ potential height V と damping factor γ

Fig. 2. 数値計算の結果

6 まとめ

我々は今回、散逸の効果を現象論的に考慮した effective ハミルトニアンに対する、Nelson 流量子力学の拡張を行いトンネル時間に対する散逸の影響を調べた。透過確率は散逸の効果で小さくなり、直観的な理解と一致するのに対しトンネル時間はむしろ素早く障壁を通り抜ける傾向が見られ、必ずしも直観的な理解とは一致しない。これは、時間順方向の言葉で説明すれば、長い時間ポテンシャル領域にとどまっている確率変数は、光学ポテンシャルにより吸収され最終的な透過アンサンブルには含まれず、Passing time の平均に寄与しないためであると考えられる。

採用した effective ハミルトニアンの有効な範囲は散逸の効果が非常に小さいところであると考えられ、より一般的な散逸現象についての考察は必要であるが、研究を進めることにより、散逸とトンネル時間の関係について、少なくとも定性的な傾向を示すことができる、と考えている。

参考文献

- [1] E. U. Condon, Rev. Mod. Phys. 3, 43 (1931).
- [2] L. A. MacColl, Phys. Rev. 40, 621 (1932).
- [3] L. Eisenbud, *Ph.D. Thesis*, Princeton University (1948).
- [4] E. P. Wigner, Phys. Rev. 98, 145 (1955).
- [5] T. E. Hartman, J. App. Phys. 33, 3427 (1962).
- [6] A. I. Baz', Sov. J. Nucl. Phys. 5, 161 (1967).
- [7] V. F. Rybachenko, Sov. J. Nucl. Phys. 5, 635 (1967).
- [8] M. Büttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. 49, 1739 (1982).
- [9] H. W. Lee and M. O. Scully, Found. Phys. 13, 61 (1983).
- [10] M. Büttiker, Phys. Rev. B27, 6178 (1983).
- [11] S. Collins, D. Lowe, and J. R. Barker, J. Phys. C 20, 6213 (1987).
- [12] D. Sokolovski and L. M. Baskin, Phys. Rev. A36, 4604 (1987).
- [13] E. H. Hauge and J. A. Støvneng, Rev. Mod. Phys. 61, 917 (1989).
- [14] H. A. Fertig, Phys. Rev. Lett. 65, 2321 (1990).
- [15] D. Sokolovski and J. N. L. Connor, Phys. Rev. A47, 4677 (1993).

- [16] V.S. Olkhovsky and E. Recami, Phys. Rep. **214**, 339 (1992).
- [17] C. R. Leavens and G. C. Aers. In “*Scanning Tunneling Microscopy III*,” R. Wiesendanger and H.-J. Güntherodt, eds., Springer-Verlag, Berlin (1993).
- [18] T. Martin and R. Landauer, Phys. Rev. **A47**, 2023 (1993).
- [19] S. Brouard, R. Sala, and J. G. Muga, Phys. Rev. **A49**, 4312 (1994).
- [20] R. Landauer and Th. Martin, Rev. Mod. Phys. **66**, 217 (1994).
- [21] A. M. Steinberg, Phys. Rev. Lett. **74**, 2405 (1995).
- [22] E. Nelson, Phys. Rev. **150**, 1079 (1966).
- [23] K. Imafuku, I. Ohba and Y. Yamanaka, Phys. Lett. A **204**, 329 (1995)
- [24] I. Ohba, K. Imafuku and Y. Yamanaka, Suppl. A to J. Phys. Soc. Jpn. Vol65, (1996)
- [25] K. Imafuku, I. Ohba and Y. Yamanaka, quant-ph/9611007,
(to be appeared in Phys. Rev. A (01Aug97))